

بررسی عددی پدیده دوده در یک موتور اشتعال تراکمی

علی نصیری طوسی*^۱ و عطیه صفائی عرشی^۲

۱- استادیار، مهندسی خودرو، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، anasiri@iust.ac.ir

۲- کارشناس ارشد، مهندسی خودرو، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، at_safaei@auto.iust.ac.ir

(تاریخ دریافت: ۹۷/۱/۱۷، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۵/۱۵، پذیرش: ۹۷/۶/۱۹)

* نویسنده مخاطب

چکیده: امروزه، بخش قابل توجهی از انرژی حاصل احتراق سوخت‌های هیدروکربنی است. بنابراین، تلاش برای بهبود و اصلاح فرایندهای احتراقی و کاهش محصولات احتراق امری بسیار حائز اهمیت است. در این میان، تلاش برای کاهش انتشار دوده، به‌عنوان یکی از آلاینده‌های مهم که اثرات جبران‌ناپذیری بر سلامت انسان دارد، سال‌هاست که آغاز شده و از جهات گوناگون بررسی شده است. در این مقاله، پدیده تشکیل دوده، با استفاده از یکی از مدل‌های چندمرحله‌ای و پرکاربرد ارائه شده برای تشکیل و اکسیداسیون دوده، مدل شده است. مدل‌سازی عددی دوده با استفاده از کد کیوا نسخه 3V انجام شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی فشار محفظه احتراق و مقدار دوده تشکیل شده در یک موتور دوزمانه دیزل با سیستم تزریق مستقیم اعتبارسنجی شده است. مشخصه‌های دوده، مانند غلظت گونه‌های تشکیل دهنده دوده، غلظت، تعداد، قطر، جرم، حجم و کسر حجمی ذرات دوده و زمان و مکان توده دوده در داخل سیلندر به‌عنوان خروجی بررسی شده است که با نتایج ذکر شده در منابع تطابق خوبی دارد.

کلیدواژگان: احتراق، آلاینده، دوده، مدل‌سازی عددی

مقدمه

تلاش برای کاهش انتشار آلاینده‌ها، به‌علت شناخت اثرات زیان‌بار آن‌ها بر سلامت و کیفیت زندگی انسان و جانداران و از بین رفتن محیط‌زیست، سال‌هاست که آغاز شده است و توسط بسیاری از دولت‌ها در حال اجراء است. به‌همین دلیل، در چند سال گذشته، یکی از اولویت‌های اصلی مراکز تحقیقاتی در زمینه احتراق بررسی فرایندهای احتراقی و بهینه‌سازی این فرایندها از طریق بهینه‌سازی پارامترهای طراحی و عملکردی در موتورها و حتی سوخت‌های مورد استفاده بوده است.

درمیان منابع انتشار آلاینده‌ها، سوخت دیزل به‌عنوان یکی از منابع مهم آلاینده‌گی شناخته می‌شود که گونه‌هایی چون ذرات^۱، هیدروکربن‌های آروماتیک چندحلقه‌ای^۲، فلزات سنگین^۳ و اکسیدهای نیتروژن از آن انتشار می‌یابند [۲، ۱]. این گونه‌ها در فرایند احتراق تولید می‌شوند و اغلب به‌صورت ذرات معلق در هوا^۴ در گازهای ناشی از احتراق یافت می‌شوند و به‌عنوان عوامل خطرناک برای سلامتی شناخته می‌شوند. درمیان گونه‌های انتشار یافته از یک موتور دیزل، ذرات، به‌علت ماندگاری طولانی مدت آن‌ها در جو به‌دلیل سبکی و تأثیر مستقیم و گسترده آن‌ها بر اندام تنفسی، یک تهدید جدی برای سلامت انسان محسوب می‌شوند و از این‌روست که مطالعات گسترده‌ای تاکنون در این زمینه صورت گرفته است و همچنان نیز ادامه دارد [۳].

1. Particulate matter (PM)
2. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs)
3. Heavy metal
4. Aerosol

در سال‌های گذشته، محققان حوزه سلامت ارتباط ذرات با قطر کمتر از ۱۰ میکرومتر (PM_{10}) را با بیماری‌های ریوی مزمن، سرطان ریه، آنفولانزا، آسم و افزایش نرخ مرگ‌ومیر اعلام کردند. با این حال، مطالعات علمی اخیر و گزارشات سازمان سلامت جهانی^۱ نشان می‌دهد [۴] که این ارتباط با ذرات ریز با قطر کمتر از ۲/۵ میکرومتر^۲ ($PM_{2.5}$) و ذرات بسیار ریز با قطر کمتر از ۰/۱ میکرومتر^۳ ($PM_{0.1}$) بیشتر مشاهده می‌شود، چرا که این ذرات، به‌علت اندازه بسیار کوچک خود، به‌راحتی می‌توانند در عمق ریه‌ها نفوذ کنند [۱،۳].

به‌منظور پرداختن به مسئله آلاینده‌ها و کاهش آن‌ها، تحقیقات بسیار زیادی در ارتباط با کیفیت هوا و خاصیت سمی و شیمیایی ذرات در طی ۴۰ سال گذشته انجام شده است. این تحقیقات نشان داد که بخش عمده ذرات از دوده نشأت می‌گیرد که در موتور دیزل تشکیل می‌شوند. از این رو، درک و بررسی فرایندهای تشکیل دوده و شناخت روش‌هایی برای حذف یا کاهش آن بسیار ضروری است. مطالعات متعددی در مورد دوده منتشرشده از موتورهای دیزل، برای بررسی فرایندهای تشکیل دوده، کسر حجمی دوده، تعداد ذرات، قطر متوسط ذرات و توزیع آن‌ها، خواص دوده، ساختار و ترکیب شیمیایی آن و همچنین اثرات آن بر سلامت زندگی بشر در طی سالیان گذشته و با درک اثرات جبران‌ناپذیر آن، صورت گرفته است تا زمینه‌ساز راه‌کارهای جدید برای کاهش تولید آن در فرایندهای احتراقی و برآورده کردن ملزومات و محدودیت‌های احتمالی آتی برای انتشار ذرات باشد [۳].

کیم و همکاران [۲]، در سال ۲۰۱۵ میلادی، در مقاله‌ای مروری، مطالعات انجام‌شده در زمینه مدل‌سازی دوده در موتورهای دیزل را انتشار دادند. در این مقاله آمده است که بررسی تشکیل دوده به‌صورت رسمی در دهه ۱۹۷۰ میلادی آغاز شد و مطالعات تسنر و همکارانش در سال ۱۹۷۱ یکی از اولین مدل‌های ارائه‌شده در گروه مدل‌های تجربی و نیمه‌تجربی بود. در طی سال‌های پس از آن، با ارائه مدل‌های تجربی و نیمه‌تجربی بیان‌کننده رفتار دوده توسط خان، هیروياسو و ماس، پیشرفت‌های زیادی در زمینه پیش‌بینی این پدیده حاصل شد، اما پیشرفت اصلی در زمینه مطالعه پدیده دوده با معرفی مدل‌های دوده دقیق آغاز شد [۲].

در سال ۱۹۹۴ میلادی، فاسکو و همکارانش [۵] یک مدل دوده پدیدارشناختی^۴، برای رفع محدودیت‌های مدل‌های دوده‌ای که پیش از این ارائه شده بود، پیشنهاد کردند. مدل دوده ارائه‌شده توسط آن‌ها فرایندهای آغاز پیدایش، رشد، انعقاد و اکسیداسیون دوده را در هشت مرحله بیان می‌کند. این مدل شامل چهار معادله دیفرانسیل برای نرخ تغییر تعداد در واحد حجم ذرات، رادیکال‌های پیش‌ماده دوده، استیلین و کسر حجمی دوده بود.

در سال ۲۰۰۱ میلادی، تائو و همکارانش [۶] مدل دوده جدیدی را ارائه کردند. در این مدل، سوخت دیزل به‌صورت تک‌جزئی فرض شد و شیمی اکسیداسیون آن تنها با سینتیک n-هپتان نشان داده شد. مکانیزم شیمیایی مورد استفاده در مدل آن‌ها به ۶۵ گونه و ۲۷۳ واکنش اولیه ساده‌سازی شد و واکنش‌های تشکیل PAH^۵ از استیلین به‌عنوان آغازگر تشکیل دوده در این مدل در نظر گرفته شد.

در سال ۲۰۰۹ میلادی، مدل دوده ارائه‌شده توسط فاسکو برای پیش‌بینی فرایندهای تشکیل و اکسیداسیون دوده توسط تائو و همکارانش ارتقا داده شد [۲]. این مدل ویژگی‌های مدل اصلی را حفظ کرد، اما دارای تغییراتی نیز بود. در این مدل، برخلاف مدل قبلی، سوخت در اثر پیرولیز تنها به استیلین تبدیل می‌شد و پس از آن استیلین منجر به تشکیل پیش‌ماده دوده می‌شد. در این مدل، با توجه به اهمیت سهم رادیکال OH در اکسیداسیون دوده، یک مرحله واکنش مربوط به اکسیداسیون توسط OH نیز در نظر گرفته شد.

1. World Health Organization (WHO)
2. Fine particles
3. Ultra-fine particles
4. phenomenological
5. Polycyclic Aromatic Hydrocarbons

در سال ۲۰۱۰ میلادی، ویسواناتان و ریتز [۷] یک مدل کاربردی بر پایه چهار مرحله اساسی ارائه کردند و نتیجه گرفتند که مدل دوده تاحدودی به مکانیزم‌های شیمیایی PAH حساس است.

در سال ۲۰۱۲ میلادی، سوکوماران و همکارانش [۸] از یک مدل دوده چندمرحله‌ای کوپل‌شده با مکانیزم‌های واکنش اکسیداسیون سوخت و تشکیل PAH ها استفاده کردند. در مدل آن‌ها، مکانیزم n-هپتان با مکانیزم دقیق تشکیل PAH ترکیب شد و پیرن^۱ به‌عنوان پیش‌ماده در نظر گرفته شد. مکانیزم واکنش کلی استفاده‌شده توسط آن‌ها شامل ۶۸ گونه و ۱۴۵ واکنش بود. طبق مطالعات آن‌ها بر روی این مدل، انتشارات دوده از موتور به‌شدت به دما و ترکیبات شیمیایی حساس است.

در سال ۲۰۱۳ میلادی، چنگ و همکارانش [۹] یک مدل دوده دقیق اصلاح‌شده برای بررسی‌های عددی تشکیل، غلظت و توزیع اندازه‌های ذرات دوده در دیزل ارائه کردند. اثرات پیش‌ماده‌های دوده از جمله ایزومرهای استیلن و PAH ها، فرایندهای رسوب PAH روی سطح ذره، تشکیل دوده و رشد سطحی ذره در این مدل در نظر گرفته شد. آن‌ها دریافتند که مقادیر زیادی از ذرات کوچک دوده (در محدوده ۵ تا ۴۰ نانومتر) در مرحله احتراق، توسط واکنش‌های تجزیه و پلیمریزاسیون^۲ سوخت‌های هیدروکربنی، تشکیل می‌شوند. در مرحله میانی احتراق، رشد ذرات دوده با انعقاد ذرات، رشد سطحی و رسوب PAH ها ادامه می‌یابد. در مرحله نهایی احتراق، توزیع اندازه ذرات، به‌علت واکنش‌های اکسیداسیون، بیشتر در محدوده ۵ تا ۲۰ نانومتر تثبیت می‌شود.

در کنار مدل‌های مطرح‌شده برای شبیه‌سازی در موتورهای اشتعال تراکمی با انواع سوخت‌های دیزل و بررسی تشکیل دوده در آن‌ها، در سال‌های اخیر، با مطرح‌شدن بحث‌هایی در زمینه تغییر نوع سوخت‌ها با اهداف کاهش آلایندگی، کاهش مصرف سوخت‌های فسیلی و استفاده از منابع جدید و پاک‌تر انرژی، بررسی فرایندهای احتراقی با سوخت‌هایی نظیر بیودیزل، که قابلیت جایگزینی در موتورهای دیزل را دارد، و بررسی آلاینده‌های انتشاریافته در اثر احتراق آن‌ها نیز مطرح شده است. این سوخت‌ها، با توجه به ساختار متفاوتی که با سوخت‌های دیزل متداول دارند، بسته به نوع ساختارشان رفتار متفاوتی را در انتشار آلاینده‌ها از خود نشان می‌دهند.

در سال ۲۰۱۶ میلادی، وانگ و همکارانش [۱۰] به مطالعه تشکیل دوده در موتور دیزل با نمونه‌های مختلف سوخت بیودیزل با استفاده از کد کیوا پرداختند. آن‌ها در بررسی‌های خود این نتایج کلی را ارائه کردند که در سوخت‌های بیودیزل با پیوندهای دوگانه کم‌تر کربن-کربن تشکیل دوده کاهش می‌یابد. همچنین، به‌علت وجود محتوای اکسیژن بیشتر در بیودیزل‌ها نسبت به سوخت‌های دیزل، نرخ اکسیداسیون دوده بهبود یافته و در مجموع منجر به کاهش تولید دوده می‌شود.

در سال ۲۰۱۸ میلادی، یانگ و همکارانش [۱۱] به بررسی عددی ذرات دوده در احتراق کم‌دمای دیزل با سوخت‌های دیزل و بیودیزل پرداختند. آن‌ها، با اضافه‌کردن مکانیزم واکنش شیمیایی بیودیزل برای شبیه‌سازی احتراق در کیوا و بحث بر روی ساختار بیودیزل، به نتایج مشابهی با وانگ و همکارانش در زمینه احتراق دیزل و مقایسه آن با بیودیزل دست یافتند.

در سال ۱۳۸۹، پورقاسمی و همکارانش [۱۲]، در بررسی سازوکار کاهش آلاینده‌های دوده و NO در موتورهای دیزل پاشش مستقیم، از مدل دومرحله‌ای هیروواسو برای مدل‌سازی دوده در کد کیوا استفاده کردند.

در سال ۱۳۹۶، منصوری و همکارانش [۱۳]، در مطالعه اثر انتقال حرارت شعشی در محفظه احتراق یک موتور احتراق داخلی اشتعال تراکمی، برای مدل‌سازی دوده از مدل سینک و همکارانش [۱۴]، که برمبنای مدل فاسکو [۵] بود، استفاده کردند. با توجه به اهمیت بررسی این پدیده و نیز فقدان مرجعی که این پدیده را به‌تنهایی از نظر پارامترهای مختلف آن مورد بررسی قرار دهد و همچنین، با توجه به نیاز به بررسی مدل‌سازی دوده حتی در زمینه استفاده از سوخت‌های تجدیدپذیری مانند بیودیزل که بحث استفاده از آن بسیار فراگیر شده است، در این مقاله، به بررسی روند تشکیل و اکسیداسیون دوده در یک موتور اشتعال تراکمی با استفاده از یک مدل دوده دقیق پرداخته می‌شود. از طرفی، با توجه به اهمیت سهم موتورهای

1. Pyrene
2. Polymerization

دوزمانه در حمل و نقل و تولید انرژی و اینکه بحث آلاینده‌های موتورهای دوزمانه در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است، در این بررسی از یک موتور دیزل دوزمانه برای شبیه‌سازی و بررسی پارامترهای دوده در آن استفاده شده است.

روند شبیه‌سازی

در این تحقیق، برای بررسی پدیده دوده و مدل‌سازی آن در یک موتور اشتعال تراکمی، از کد کیوا نسخه 3V¹ استفاده شده است. این کد، که در آزمایشگاه تحقیقاتی-نظامی لاس آلاموس تهیه شده است، بیشتر برای کاربرد در موتورهای احتراق داخلی توسعه یافته است. از آنجا که در کد کیوا امکان دسترسی و تغییر در کد اصلی وجود دارد و می‌توان، بسته به نیاز، مدل‌های موجود در آن را اصلاح کرده و یا تغییر داد، این کد برای انجام مدل‌سازی انتخاب شده است.

موتور مورد مطالعه در این شبیه‌سازی موتور دیزل تحقیقاتی پروتئوس² بر پایه موتور تک‌سیلندر ریکاردو پروتئوس است که به حالت عملکرد در چرخه دوزمانه تبدیل شده است. در این موتور دوده تولیدشده در ضمن فرایند احتراق با استفاده از محفظه چشمی تعبیه‌شده در سرسیلندر مطالعه و بررسی شده است. اطلاعات کامل در مورد چگونگی انجام مطالعات تجربی و ثبت نتایج مربوط به دوده در این موتور به‌طور کامل در مرجع 15 ارائه شده است.

برای انجام شبیه‌سازی، در گام نخست، لازم است تا هندسه مسئله و شبکه‌بندی آن آماده شود. در گام بعدی، اطلاعات شبکه‌بندی ایجادشده، شرایط عملکردی، شرایط اولیه و شرایط مرزی موتور در قالب فایل‌های ورودی کد ایجادشده و توسط آن برای انجام شبیه‌سازی خوانده می‌شود. در نهایت، اطلاعات خروجی ثبت‌شده از اجرای کد، به‌منظور بررسی نتایج و تحلیل آن‌ها، با استفاده از نرم‌افزار پس‌پردازش به داده‌های مناسب برای رسم نمودارها و کانتورهای قابل تحلیل و بررسی تبدیل می‌شوند.

آماده‌سازی شبکه

هندسه موتور پروتئوس در حالت چرخه بسته، با استفاده از مشخصات فنی موتور ارائه‌شده در جدول 1، در نرم‌افزار Solidworks مدل شده است.

جدول 1- مشخصات فنی موتور [15]

Table 1- Engine specification [15]

Bore	13.5 cm
Stroke	15 cm
Length of connection rod	27.5 cm
Compression ratio	9:1
Displacement volume	2200 cm ³

شبکه مدل با استفاده از نرم‌افزار پیش‌پردازش کد کیوا تهیه شده است. از آنجا که کد کیوا نسخه 3V تنها قابلیت تحلیل شبکه‌های سازمان‌یافته را دارد، این شبکه تنها از مش‌های مکعبی شش‌وجهی تشکیل شده است. شبکه ایجادشده برای انجام شبیه‌سازی در شکل 1 نشان داده شده است.

به‌منظور دستیابی به شبکه‌ای با تعداد مش مناسب که تمام وقایع را پوشش دهد و در عین حال زمان حل را طولانی نکند، لازم است تا شبکه ایجادشده از نظر تعداد مش ارزیابی شود. برای ارزیابی تعداد مش مناسب برای شبکه، از تغییرات مؤلفه سرعت در راستای محور عمودی (از آنجا که مقادیر سایر مؤلفه‌های سرعت نزدیک به صفر بوده است) در سه نقطه نمونه A، B و C روی محور محفظه احتراق استفاده شده است. مکان این سه نقطه روی محور محفظه احتراق در شکل 2 نشان داده شده است. مقادیر سرعت برای تعداد مش‌های 4000، 5500 و 7000 مقایسه شده است. با توجه به شکل 3 که تغییرات مؤلفه

1. KIVA3V
2. Proteus

قائم سرعت را در سه نقطه نمونه از محور محفظه احتراق نشان می‌دهد، مقادیر مؤلفه قائم سرعت برای شبکه‌های با تعداد مش‌های ۷۰۰۰۰ و ۵۵۰۰۰ بسیار نزدیک است. از این‌رو، به‌منظور صرفه‌جویی در زمان محاسبات، شبکه با تعداد ۵۵۰۰۰ مش برای شبیه‌سازی استفاده شده است.

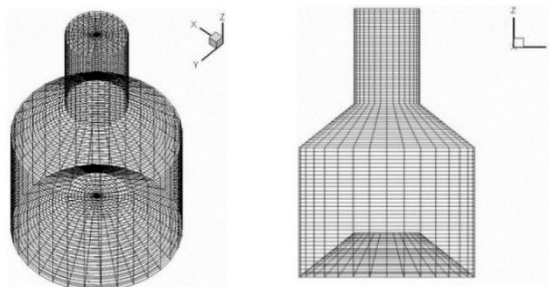


Figure 1- Computational grid at BDC for Proteus

شکل ۱- هندسه شبکه‌بندی شده موتور

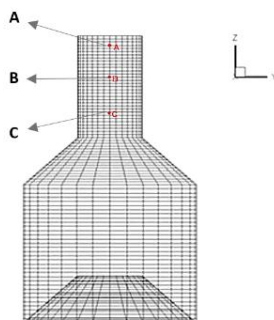


Figure 2- Points specified on the axis of the combustion chamber to compare number of meshes

شکل ۲- نقاط تعیین شده بر روی محور محفظه احتراق برای مقایسه تعداد مش‌ها

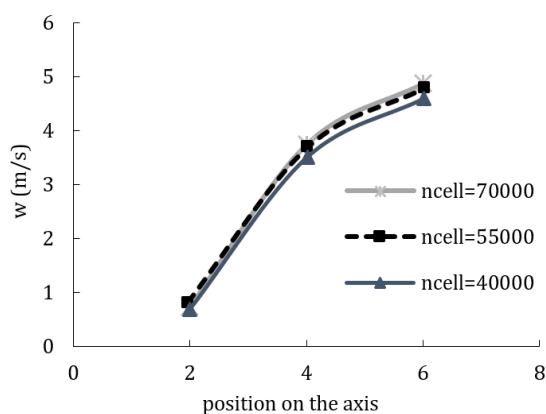


Figure 3- Comparing w-component of velocity at points A, B and C on the axis of combustion chamber

شکل ۳- مقایسه مؤلفه سرعت w در سه نقطه A، B و C انتخاب شده روی محور محفظه احتراق

معادلات حاکم

معادلات حاکم بر جریان سیال در کد کیوا نسخه 3V با روابط زیر تعریف می‌شوند. اطلاعات کامل در مورد این روابط در مرجع ۱۶ ارائه شده است.

بقای جرم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = \dot{\rho}^s \quad (1)$$

در رابطه (۱)، u سرعت سیال، ρ چگالی کل و $\dot{\rho}^s$ تغییر جرم سوخت در اثر تبخیر است.

بقای تکانه:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u) = \rho g + F^s - \frac{1}{a^2} \nabla p + \nabla \cdot \bar{\sigma} - A_0 \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \rho k \right) \quad (2)$$

در رابطه (۲)، F^s افزایش تکانه، p فشار سیال، σ تانسور نیروهای لزج و k انرژی جنبشی اغتشاشی است.

بقای انرژی:

$$\frac{\partial(\rho l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u l) = -\nabla \cdot J + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s - p \nabla \cdot u + (1 - A_0) \bar{\sigma} : \nabla u + A_0 \rho \varepsilon \quad (3)$$

در رابطه (۳)، J بردار شار حرارتی، \dot{Q}^c گرمای واکنش شیمیایی، \dot{Q}^s گرمای ایجاد شده در اثر پاشش سوخت و ε اتلاف

انرژی جنبشی اغتشاشی است.

شار حرارتی:

$$J = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (4)$$

در رابطه (۴)، K ضریب هدایت حرارت، T دمای سیال، h_m آنتالپی مخصوص گونه m و ρ_m جرم گونه شیمیایی m است.

معادلات حالت:

$$I(T) = \sum_m \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) I_m(T)$$

$$c_p(T) = \sum_m \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) c_{pm}(T)$$

$$h_m(T) = I_m(T) + \frac{R_0 T}{W_m} \quad (5)$$

$$p = R_0 T \sum_m \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (6)$$

در رابطه (۵) و (۶)، I انرژی داخلی مخصوص، c_p گرمای ویژه در فشار ثابت، R_0 ثابت جهانی گازها و W_m وزن مولکولی

گونه m است.

سازگاری جرم:

$$\sum_{m=1}^{N_c} \frac{\rho_m}{\rho} = 1 \quad (7)$$

بقای جرم برای اجزای شیمیایی m ($m=1, \dots, N_c$):

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m u) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}_m^s \delta_{m1} \quad (8)$$

مدل آشفنتگی $\varepsilon - k$:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot u + \bar{\sigma} : \nabla u + \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{\rho r_k} \right) \nabla k \right) - \rho \varepsilon + \dot{W}^s \quad (9)$$

استهلاک انرژی جنبشی آشفته:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \varepsilon) = -\left(\frac{2}{3} c_{\varepsilon_1} - c_{\varepsilon_3} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot u + \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{\rho r_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon_1} \bar{\sigma} : \nabla u - c_{\varepsilon_2} \rho \varepsilon + c_s \dot{W}^s) \quad (10)$$

مدل دوده

کد کیوا دارای مدل دوده‌ای برمبنای مدل دوده ساروویکین [۱۷] است که با چک کردن شرط دمایی مناسب برای شروع واکنش‌های تشکیل دوده با استفاده از دمای t_{cuts} ، که در فایل ورودی itape5 وارد می‌شود، فعال می‌شود. این مدل با معرفی سه گونه جدید (علاوه بر ۱۲ گونه اصلی کیوا) به محاسبات مربوط به دوده می‌پردازد. در واقع، مدل دوده کیوا از دو گونه اولیه و میانی برای تشکیل دوده استفاده می‌کند. در این مدل، برای اکسیداسیون ذرات دوده از مدل اکسیداسیون ناگل-استریکلند کانستبل [۱۸] استفاده شده است. اگرچه مدل دوده کیوا برمبنای مدل دوده ساروویکین و مدل اکسیداسیون ناگل-استریکلند کانستبل نوشته شده است، اما، به دلیل الگوریتم نامناسب حل و عدم برقراری ارتباط میان روابط مربوط به تشکیل و اکسیداسیون دوده با دیگر بخش‌ها، امکان پیش‌بینی دقیقی از دوده تشکیل شده توسط آن وجود ندارد. با معرفی مدل‌های دوده دقیق برای پیش‌بینی تشکیل دوده در سال‌های اخیر و با توجه به اینکه مدل اصلی دوده در کد کیوا دارای ضعف است، استفاده از یک مدل دقیق برای پیش‌بینی تشکیل و اکسیداسیون دوده در کد کیوا و جایگزینی آن با مدل اصلی ضروری به نظر می‌رسد. برای این منظور، از یک مدل دوده نه‌مرحله‌ای دقیق، که توصیف‌کننده مراحل تشکیل گونه‌های اولیه تشکیل‌دهنده دوده، تشکیل ذرات اولیه دوده، رشد ذرات در اثر برخورد، رشد سطحی ذرات و اکسیداسیون ذرات دوده و گونه‌های رشد است، استفاده شده است. روابط مدل دوده، در ادامه، به اختصار، ارائه شده است و شرح کامل مدل و فرضیات آن در مرجع ۱۹ آمده است.

مرحله اول: در این مرحله، استیلن (C_2H_2) از سوخت تشکیل می‌شود:



در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_1 = 1.0 \times 10^{10} \exp\left(-2.5 \times \frac{10^4}{T}\right) \quad (s^{-1}) \quad (12)$$

در رابطه (۱۲)، m نشان‌دهنده اتم‌های کربن موجود در سوخت است. در تمامی روابط مربوط به تشکیل و اکسیداسیون دوده، [] نشان‌دهنده غلظت مولی (mol/cm^3) و T نشان‌دهنده دماست.

مرحله دوم: در این مرحله، پیش‌ماده‌های دوده (R) که گونه‌های سازنده ذرات دوده اولیه‌اند از استیلن تشکیل می‌شوند:



در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_2 = 1.0 \times 10^{11} \exp\left(-2.0 \times \frac{10^4}{T}\right) \quad (s^{-1}) \quad (14)$$

در معادله تشکیل گونه‌های پیش‌ماده، z تعداد اتم‌های کربن در گونه‌های پیش‌ماده را نشان می‌دهد. فرض شده است که پیش‌ماده‌ها، فولرن‌هایی^۱ با ۶۰ اتم کربن اند ($z=60$).

مرحله سوم: در این مرحله، ذرات اولیه دوده از پیش‌ماده‌ها تشکیل می‌شوند:



در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_3 = 5.0 \times 10^7 \exp\left(-2.52 \times \frac{10^4}{T}\right) \quad (C - \text{atom mole}^{-1} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}) \quad (16)$$

ذرات دوده در این مدل به صورت گرافیت گونه خشک و تنها شامل اتم‌های کربن فرض شده‌اند. البته، این فرض به‌ویژه برای ذرات دوده جوان^۲، که حاوی مقادیر قابل توجهی هیدروژن‌اند، فرض نادرستی است. با وجود این، در غیاب فرضیات بهتر و

1. Fullerene
2. Young soot particles

واقعی‌تر، که امکان مدل‌سازی دوده را فراهم کند، این فرض برای این مدل در نظر گرفته شده است [۲۰، ۱۹]. در این مدل، فرض شده است که ذرات دوده اولیه دارای قطری برابر ۱/۲۸ نانومتر، معادل با ۱۰۰ اتم کربن است [۱۹]. در رابطه با قطر اولیه ذرات دوده فرضیات مختلفی وجود دارد. به‌عنوان مثال، قطر اولیه ذرات دوده در مدل دوده پایه (مدل فاسکو) ۲۵ نانومتر در نظر گرفته شده است [۵]. تنها کم‌تر از ۱۰ درصد از جرم کل دوده در این مرحله تشکیل می‌شود، اما، این مرحله، به‌دلیل ایجاد سطوح اولیه (یا ناحیه‌های فعال) برای رشد و تراکم تعداد اولیه ذرات، از اهمیت زیادی برخوردار است. مرحله چهارم: در این مرحله، برخورد ذرات اولیه دوده برای تبدیل شدن به ذرات بزرگ‌تر اتفاق می‌افتد:

$$xP \xrightarrow{\dot{R}_4} P : \dot{R}_4 = \frac{1}{2} k_4 N^2 \quad (17)$$

در رابطه بالا، k_4 ثابت فرکانس برخورد است که برای رژیم‌های آزاد مولکولی تا رژیم‌های پیوسته معتبر است. $x (x \geq 2)$ تعداد ذرات شرکت‌کننده در فرایند انعقاد را به‌صورت نمادین نشان می‌دهد. از نظر محاسباتی، نرخ انعقاد با N_2 متناسب است که N تراکم تعداد ذرات دوده را نشان می‌دهد.

ثابت فرکانس برخورد توسط کازاکوف و فاستر [۲۱]، برای حالتی که فاصله آزاد متوسط گاز^۱ در فشارهای بالای محیط‌های احتراقی دیزل قابل مقایسه با اندازه ذرات است، به‌صورت زیر ارائه شده است:

$$k_4 = \frac{k_{fm} k_{nc}}{k_{fm} + k_{nc}} \quad (18)$$

فرکانس برخورد^۲ آزاد مولکولی (k_{fm}) برای ذرات هم‌اندازه با استفاده از رابطه زیر تعریف شده است:

$$k_{fm} = 4\alpha \sqrt{\frac{6k_B T d_p}{\rho_s}} \quad (19)$$

در رابطه بالا، α ضریب افزایش واندروالس^۳ است و برابر ۲ فرض شده است. k_B ثابت بولتزمن^۴ است و چگالی ذره دوده برابر با ۲ گرم بر سانتی‌مترمکعب فرض شده است. قطر ذره دوده (d_p)، با توجه به این نکته که جرم کل ذرات در مرحله انعقاد ثابت باقی می‌ماند، به‌صورت زیر تعریف شده است [۱۹-۲۲]:

$$d_p = \left(\frac{6M_C \gamma_s}{\pi N \rho_s} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (20)$$

در رابطه بالا، M_C و γ_s به‌ترتیب وزن مولکولی اتم کربن (12 g/mol) و غلظت مولی دوده را نشان می‌دهند. در هر گام زمانی، توزیع اندازه‌های ذرات دوده در هر سلول محاسباتی به این صورت است که ذرات دوده اولیه دارای قطر ۱/۲۸ نانومترند و ذرات دوده قدیمی‌تر قطری برابر با قطر متوسط ارائه‌شده توسط رابطه (۲۰) دارند. فرض بر این است که در پایان هر گام، تمام ذرات دوده موجود در سلول محاسباتی قطری برابر با قطر متوسط ذرات آن سلول دارند. سلول‌های مختلف در دامنه محاسباتی بسته به شرایط محلی دارای قطرهای متوسط متفاوتی اند [۲۲]. ثابت انعقاد نزدیک پیوستگی (k_{nc}) به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$k_{nc} = \frac{8k_B T}{\mu} (1 + 1.257Kn) \quad (21)$$

در رابطه بالا، μ گرانیوی مولکولی گاز، $Kn = 2l/d_p$ عدد نودسن^۵ و l فاصله آزاد متوسط گاز است. ضریب ۱/۲۵۷ به‌عنوان ضریب تصحیح خطا در نظر گرفته شده است [۱۹، ۲۱].

مرحله پنجم: در این مرحله، رشد سطحی ذرات دوده از طریق جذب استیلین اتفاق می‌افتد:



1. Gas mean free path
2. Collision frequency
3. Van der waals
4. Boltzman
5. Knudsen number

در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می شود:

$$k_5 = 1.05 \times 10^4 \exp\left(-3.1 \times \frac{10^3}{T}\right) (\text{cm}^{-1}\text{s}^{-1}) \quad (23)$$

این رابطه نرخ واکنش رشد سطحی، A_{soot} ، سطح کل ذرات دوده (cm^2) را که به صورت کروی شکل فرض شده اند، نشان می دهد. این مرحله، دومین مرحله مؤثر در تشکیل جرم دوده است که با جذب C_2H_2 روی سطح ذرات اتفاق می افتد [۲۲].
مرحله ششم: در این مرحله، اکسیداسیون سطح ذرات دوده با O_2 اتفاق می افتد:
اکسیداسیون سطح دوده در واکنش با اکسیژن را می توان با رابطه زیر بیان کرد:



در رابطه (۲۴)، ثابت نرخ اکسیداسیون (k_6) به صورت زیر تعریف می شود:

$$k_6 = \left[\left(\frac{k_A p_{\text{O}_2}}{1 + k_Z p_{\text{O}_2}} \right) x_A + k_B p_{\text{O}_2} (1 - x_A) \right] \quad (25)$$

در جدول ۲، واکنش های اکسیداسیون به واسطه اکسیژن به همراه ثابت های آن ها آورده شده است:

جدول ۲- واکنش های اکسیداسیون سطح با اکسیژن

Table 2- O₂-related oxidation reactions

reaction	Reaction rate
$A_{\text{site}} + \text{O}_2(\text{g}) \xrightarrow{k_A} \text{surface oxide}$	$k_A = 20 \exp\left(\frac{-15100}{T}\right) [\text{g}/\text{cm}^2 \text{satm}]$
$\text{surface oxide} \xrightarrow[k_Z]{k_A} 2\text{CO}(\text{g}) + A_{\text{site}}$	$k_Z = 21.3 \exp\left(\frac{2060}{T}\right) [\text{atm}^{-1}]$
$B_{\text{site}} + \text{O}_2(\text{g}) \xrightarrow{k_B} 2\text{CO}(\text{g}) + A_{\text{site}}$	$k_B = 4.46 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{-7640}{T}\right) [\text{g}/\text{cm}^2 \text{satm}]$
$A_{\text{site}} \xrightarrow{k_T} B_{\text{site}}$	$k_T = 1.51 \times 10^5 \exp\left(\frac{-48800}{T}\right) [\text{g}/\text{cm}^2 \text{s}]$

مرحله هفتم: در این مرحله، اکسیداسیون سطح ذرات دوده با OH اتفاق می افتد:

اکسیداسیون سطح دوده در واکنش با OH را می توان با رابطه زیر بیان کرد:



در رابطه بالا، ثابت نرخ اکسیداسیون k_7 است. برخلاف روش های اتخاذ شده در مدل های قبلی، در این مدل غلظت OH از یک سیستم $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-CO}_2$ ، که در جدول ۳ ارائه شده است، محاسبه شده است. غلظت OH با فرض شبه تعالی به صورت زیر محاسبه شده است:

$$\frac{d[\text{OH}]}{dt} = 0$$

محاسبه غلظت OH:

$$[\text{OH}] = \frac{k_1^+ [\text{H}][\text{O}_2] + k_2^+ [\text{O}][\text{H}_2] + k_3^- [\text{H}_2\text{O}][\text{H}]}{k_1^- [\text{O}] + k_2^- [\text{H}] + k_3^+ [\text{H}_2] + k_4^- [\text{OH}] + k_5^- [\text{H}][\text{M}] + k_6^+ [\text{CO}]} + \frac{k_4^+ [\text{O}][\text{H}_2\text{O}] + k_5^+ [\text{H}_2\text{O}][\text{M}] + k_6^- [\text{CO}_2][\text{H}]}{k_1^- [\text{O}] + k_2^- [\text{H}] + k_3^+ [\text{H}_2] + k_4^- [\text{OH}] + k_5^- [\text{H}][\text{M}] + k_6^+ [\text{CO}]} \quad (27)$$

در رابطه بالا، k_i^+ و k_i^- به ترتیب نشان دهنده ثابت های نرخ واکنش رفت و برگشت واکنش i ام هستند ($i=1,6$). M نشان دهنده گونه سوم است و $[M] = \frac{P}{RT}$. غلظت های O و H با به کار بردن محاسبات تعادل شیمیایی برای واکنش های زیر محاسبه شده اند:

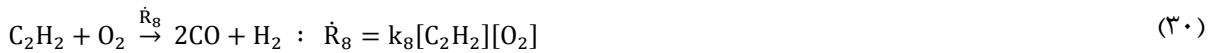


جدول ۳- سیستم $H_2-O_2-CO_2$ ارائه شده برای محاسبه شبه تعادلی OH [۲۳]

Table 3- The H_2-O_2-OH system used for the quasi-steady state OH calculation [23]

No.	Reactions	K_f		
		A	b	E (cal/mol)
1	$H + O_2 \leftrightarrow O + OH$	1.915e14	0.00	1.644e4
2	$O + H_2 \leftrightarrow OH + H$	5.080e04	2.67	6.292e3
3	$OH + H_2 \leftrightarrow H_2O + H$	2.160e08	1.51	3.430e3
4	$O + H_2O \leftrightarrow OH + OH$	2.970e06	2.02	1.340e4
5	$H_2O + M \leftrightarrow H + OH + M$	1.912e23	-1.83	1.185e5
6	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	9.430e03	2.25	-2.351e3

مرحله هشتم: در این مرحله، اکسیداسیون استیلن با اکسیژن اتفاق می افتد:



در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می شود [۱۲، ۹]:

$$k_8 = 6.0 \times 10^{12} \exp\left(-2.52 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ (mole}^{-1}\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{)} \quad (31)$$

مرحله نهم: در این مرحله، اکسیداسیون گونه های پیش ماده (R) با اکسیژن اتفاق می افتد:



در رابطه بالا، ثابت نرخ واکنش به صورت زیر تعریف می شود [۱۲]:

$$k_9 = 1.0 \times 10^9 \exp\left(-2.0 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ (mole}^{-1}\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{)} \quad (33)$$

مراحل ۱، ۲، ۸ و ۹ عبارت های کلی برای واکنش های فاز گازی اند، در حالی که واکنش های ۳، ۴، ۵، ۶ و ۷ واکنش های مربوط به ذرات را توصیف می کنند. نرخ خالص تشکیل برای چگالی جرم دوده (Y_s) و تراکم تعداد دوده (N) در این مدل به صورت زیر بیان شده اند:

$$\frac{d}{dt}(Y_s) = M_C(\dot{R}_3 + \dot{R}_5 - \dot{R}_6 - \dot{R}_7) \quad (34)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{N}{N_A}\right) = \frac{M_C}{M_{nuc}}\dot{R}_3 - \dot{R}_4 \quad (35)$$

در روابط بالا، N_A و M_{nuc} به ترتیب عدد آووگادرو و وزن مولکولی یک هسته ذره اند. دو معادله (۳۴) و (۳۵) شامل نرخ های واکنش های سینتیکی فرایندهای تشکیل، انعقاد و اکسیداسیون دوده اند که به شدت در اختلاط آشفته تحت تأثیر قرار می گیرند. در این مدل، برای در نظر گرفتن اثر آشفته گی از ضریب تصحیحی که ترکیب مقیاس های زمانی^۱ شیمیایی و آشفته گی است، برای بیان نرخ واکنش ها در معادله های (۳۴) و (۳۵)، استفاده می شود [۲۲، ۱۹]:

$$\dot{R}'_i = \frac{\tau_{ch,i}}{\tau_{ch,i} + \tau_{mix}} \dot{R}_i \quad \tau_{mix} = c \frac{k}{\varepsilon} \quad (36)$$

در رابطه (۳۶)، $\tau_{ch,i}$ مقیاس زمانی شیمیایی^۲ برای هرگام است. τ_{mix} مقیاس زمانی اختلاط^۳، k انرژی جنبشی آشفته گی، ε نرخ اتلاف آشفته گی است و c دارای مقدار ۰/۲۵ است [۱۹].

1. Time scale
2. Chemical time scale
3. Mixing time scale

اعتبارسنجی شبیه‌سازی

از آنجا که برای استناد به نتایج شبیه‌سازی لازم است تا صحت این نتایج تأیید شود، در ابتدا، لازم است تا نتایج حاصل از کد با استفاده از نتایج تجربی اعتبارسنجی شده و پس از اطمینان از صحت آن، نتایج استخراج‌شده از شبیه‌سازی به‌طور کامل تفسیر شوند. این فرایند باید در دو مرحله انجام شود. مرحله اول، اعتبارسنجی کد اصلی کیواست که با مدل‌سازی موتور مورد مطالعه و با استفاده از داده‌های تجربی فشار داخل سیلندر برای اعتبارسنجی شرایط فشار و نتایج احتراق استفاده می‌شود. در مرحله دوم، پس از اضافه‌کردن زیربرنامه دوده به کد اصلی کیوا، نتایج مدل دوده با داده‌های تجربی دوده برای اعتبارسنجی استفاده می‌شود.

اعتبارسنجی با داده‌های فشار درون محفظه احتراق

در شکل ۴، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی فشار سیلندر در دور ۵۰۰ rpm مقایسه شده است. شرایط کارکرد موتور در جدول ۴ ارائه شده است. با توجه به شکل ۴، داده‌های تجربی و نتایج شبیه‌سازی با دقت قابل قبولی برهم منطبق‌اند. بیشینه فشار در داده‌های تجربی ۷۴/۰۷ بار است و در زاویه $-1/88$ درجه رخ می‌دهد، درحالی‌که، بیشینه فشار حاصل از شبیه‌سازی ۷۶/۶۴ بار در زاویه $-1/96$ درجه است، که نشان‌دهنده ۳ درصد خطا در محاسبه بیشینه مقدار فشار و ۴ درصد خطا در محاسبه مکان وقوع آن است.

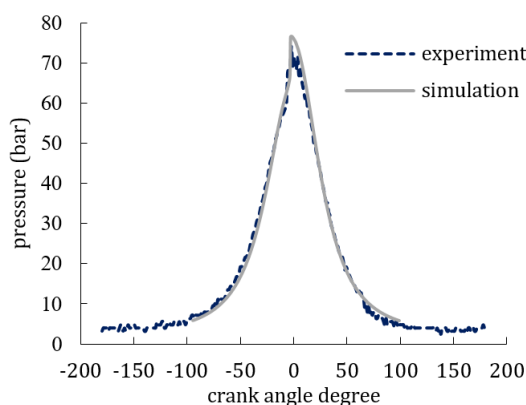


Figure 4- Validation of simulation results using in-cylinder pressure at 500 rpm

شکل ۴- اعتبارسنجی شبیه‌سازی به کمک نمودار فشار درون محفظه احتراق در دور ۵۰۰ rpm

جدول ۴- شرایط کارکرد موتور در دور ۵۰۰ rpm [۱۵]

Table 4- Operating conditions of the engine at 500 rpm

CA when ports are closed	260
In-cylinder pressure when ports are closed (KPa)	590
In-cylinder temperature when ports are closed (K)	375
In-cylinder pressure (TDC not firing) (MPa)	6
Cylinder wall temperature (K)	423
Cylinder head temperature (K)	363
Piston temperature (K)	450
Injection pressure (MPa)	147.3
Injected fuel quantity (mm ³)	30
Duration of fuel injection (CA)	7.29
Start of fuel injection	-15 °CA after TDC
Intake air temperature (K)	393
Intake air pressure (MPa)	0.2

اعتبارسنجی با نتایج تجربی دوده

از آنجا که اعتباردهی نتایج شبیه‌سازی به کمک داده‌های فشار سیلندر دلیل بر صحت و دقت شبیه‌سازی دوده نیست و مستقل از تشکیل و یا عدم تشکیل دوده در موتور، صحت وقوع احتراق در داخل سیلندر را نشان می‌دهد، لازم است، اعتبارسنجی مدل دوده با استفاده از داده‌های تجربی دوده صورت گیرد. در شکل ۵، داده‌های تجربی و شبیه‌سازی برای کسر حجمی دوده نشان داده شده است. تشکیل دوده از زاویه $3/51$ - شروع شده است و از آنجا که اطلاعات تجربی دوده تا 6 درجه بعد از تولید آن در دسترس است (با توجه به بررسی تجربی تولید دوده در داخل سیلندر)، تمام نمودارهای پارامترهای مختلف دوده تا همین زاویه ارائه شده‌اند.

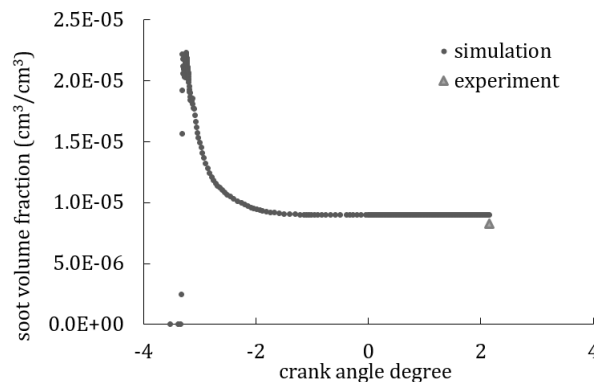


Figure 5- Validation of simulation results using soot volume fraction

شکل ۵- اعتبارسنجی شبیه‌سازی به کمک کسر حجمی دوده

نتایج حاصل از شبیه‌سازی و نتایج تجربی در بررسی دوده تولیدشده در داخل سیلندر با دقت قابل قبولی برهم منطبق‌اند. مقدار کسر حجمی دوده در نتایج شبیه‌سازی $8/98 \times 10^{-6}$ است که نسبت به مقدار گزارش‌شده تجربی ($8/26 \times 10^{-6}$) دارای ۸ درصد خطاست.

توضیح این نکته لازم است، با وجود آنکه در اکثر بررسی‌های تشکیل دوده در موتور از مقدار دوده در خروجی اگزوز برای اعتبارسنجی نتایج استفاده می‌شود، با دراختیارداشتن مقدار دوده در ضمن مراحل تشکیل آن (با توجه به کار تجربی انجام‌شده برای بررسی رفتار دوده در داخل سیلندر در حین مراحل تشکیل آن [۱۵]) و با توجه به اینکه هدف بررسی تشکیل دوده در داخل سیلندر است، از مقدار دوده در زاویای ذکرشده برای اعتبارسنجی نتایج استفاده شده است.

نتایج شبیه‌سازی

استیلین و پیش‌ماده

بیشینه‌بودن کسر حجمی دوده در شکل ۵ متأثر از بیشینه‌بودن مقدار گونه‌های اولیه تشکیل‌دهنده دوده (تأثیرگذار بر روی تعداد در واحد حجم ذرات) در بازه مذکور است. همان‌طور که پیش از این نیز اشاره شد، گونه‌های استیلین و پیش‌ماده آغازکننده تشکیل دوده‌اند و تغییرات دانسیته آن‌ها در ضمن واکنش‌های تشکیل دوده به‌شدت بر مقدار نهایی دوده تأثیرگذار است. در شکل‌های ۶ و ۷ به‌ترتیب تغییرات دانسیته گونه‌های استیلین (حاصل از پیرولیز سوخت) به‌عنوان گونه رشد و فولرن به‌عنوان پیش‌ماده تشکیل‌دهنده دوده، که هر دو گونه‌های میانی کنترل‌کننده تشکیل دوده‌اند، ارائه شده است. توضیح این نکته لازم است که در شکل‌های ۶ و ۷، به‌منظور نمایش بهتر تغییرات، محور افقی در بازه زاویه‌ای محدودتری از تشکیل دوده

نمایش داده شده است (بازه اصلی تشکیل دوده تا مثبت دو درجه ادامه دارد). از آنجا که در مدل دوده دما شرط انجام محاسبات دوده است، با بالارفتن دما در داخل محفظه احتراق و با رسیدن دما به محدوده مناسب برای تشکیل دوده، واکنش‌های تشکیل دوده با نرخ‌های مختلفی آغاز می‌شوند. با فراهم شدن دمای کافی برای تجزیه سوخت، استیلین تشکیل شده و به سرعت و در زمان بسیار کوتاهی به بیشینه مقدار خود می‌رسد. استیلین به‌عنوان گونه رشد در این مدل دوده مطرح می‌شود که در اثر پیرولیز سوخت تولید می‌شود و با افزایش تدریجی غلظت آن در ضمن مرحله تشکیل آن و با رسیدن به غلظت مناسب منجر به تشکیل گونه پیش‌ماده می‌شود. استیلین منجر به تشکیل پیش‌ماده شده و در ادامه پیش‌ماده‌ها ذرات دوده را تشکیل می‌دهند. این ارتباط زنجیره‌وار سبب تأثیر قابل ملاحظه مقدار استیلین بر روی مقدار پیش‌ماده تولیدشده و مقدار ذرات دوده تولیدشده است و مقدار بیشینه آن کنترل‌کننده مقدار بیشینه پیش‌ماده و در نهایت مقدار دوده است. غلظت استیلین در مراحل رشد سطحی و اکسیداسیون آن کاهش می‌یابد و منجر به کاهش سریع غلظت آن تا مرتبه 10^{-7} می‌شود. با توجه به اینکه نرخ تشکیل پیش‌ماده نسبت به نرخ تشکیل استیلین بالاتر است، این ماده معمولاً دارای بیشینه مقداری تا حدود دو برابر بیشینه مقدار استیلین است [۱۹،۲۲]. بالاتر بودن مقدار بیشینه پیش‌ماده، بیش از دو برابر غلظت استیلین، با کاهش نرخ اکسیداسیون آن به دلیل فرض‌های ساده‌شونده در نظر گرفته‌شده برای محاسبه غلظت OH و به‌واسطه آن کم‌شدن سهم اکسیداسیون به‌واسطه رادیکال OH توجیه‌پذیر است.

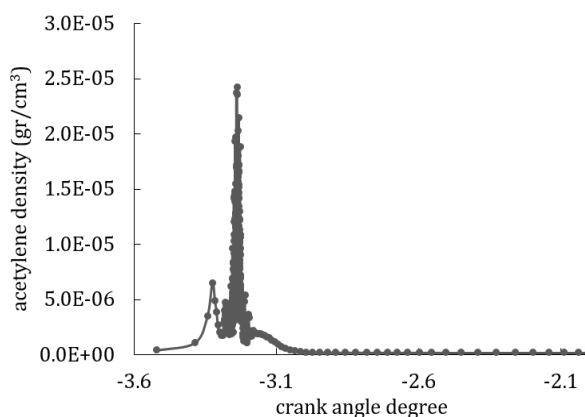


Figure 6- In-cylinder temporal evolution of acetylene density
 شکل ۶- تغییرات دانسیته استیلین با زاویه لنگ در محفظه احتراق

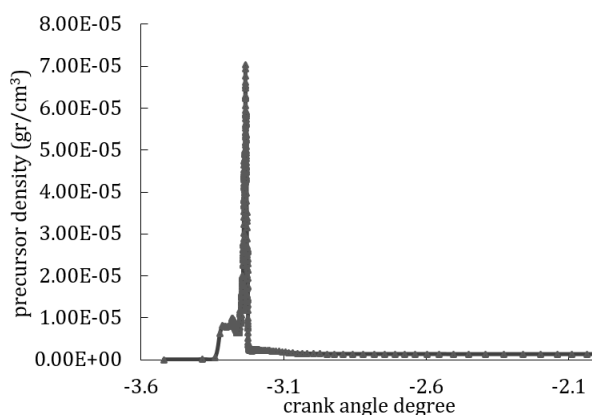


Figure 7- In-cylinder temporal evolution of precursor density
 شکل ۷- تغییرات دانسیته پیش‌ماده با زاویه لنگ در محفظه احتراق

اگرچه در مدل‌سازی‌های عددی دوده معیار عددی برای بررسی صحت نتایج ارائه‌شده برای گونه‌های استیلین و پیش‌ماده وجود ندارد، اما رفتار و روند مشاهده‌شده در شکل‌های ۶ و ۷ همانند نتایج ارائه‌شده در مطالعات مشابه مربوط به بررسی دوده است [۲۲،۱۹]. مقایسه مقدار دانسیته گونه‌های استیلین و پیش‌ماده با دانسیته نهایی دوده، که در شکل ۸ ارائه شده است، نیز ارتباط منطقی این نتایج از نظر مقدار و مطابق با روند نتایج موجود در مراجع مرتبط را نشان می‌دهد [۲۲،۱۹]. مقدار بیشینه دانسیته دوده $4/46 \times 10^{-5}$ است که بین بیشینه مقدار گونه‌های سازنده آن است.

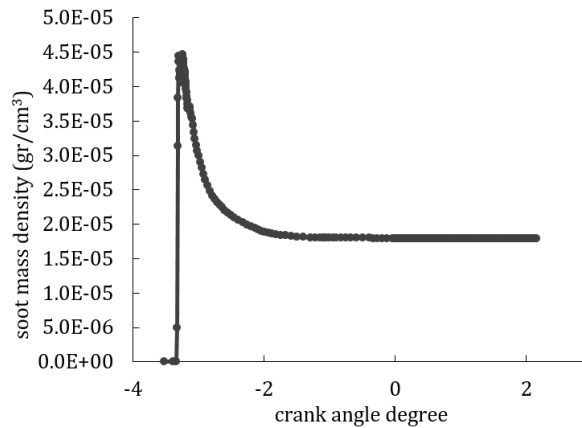


Figure 8- In-cylinder temporal evolution of soot density
 شکل ۸- تغییرات دانسیته دوده با زاویه لنگ در محفظه احتراق

تراکم تعداد ذرات دوده

در شکل ۹، تغییرات تراکم تعداد ذرات دوده (تعداد در واحد حجم ذرات) در داخل سیلندر نشان داده شده است. پیدایش ذرات جدید، بلافاصله بعد از تشکیل غلظت‌های مناسب از پیش‌ماده، منجر به افزایش تعداد ذرات می‌شود. بیشینه مقدار تراکم تعداد ذرات برابر با مقدار $2/48 \times 10^{+11}$ ذره بر واحد حجم (بر سانتی‌متر مکعب) است که از نظر حدود بزرگی مشابه مقدار محاسبه‌شده برای موتور در بررسی‌های تجربی است [۳]. پس از افزایش تعداد ذرات و فراهم شدن شرایط برخورد برای آن‌ها، در طی برخورد و ادغام ذرات، تعداد آن‌ها به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد و با فرض عدم تغییر تعداد در واحد حجم ذرات در مراحل رشد سطحی و اکسیداسیون، تا انتهای چرخه کاری به تدریج کاهش می‌یابد. واکنش‌های اکسیداسیون دوده تنها اندازه ذرات را تحت تأثیر قرار می‌دهد، در حالی که تراکم تعداد ذرات دوده بدون تغییر باقی می‌ماند. این فرض تنها هنگامی که اکسیداسیون متوسطی رخ دهد منطقی است. در یک موتور می‌توان شرایطی را انتظار داشت که ذرات دوده به‌طور کامل سوزانده می‌شود. بنابراین، فرض اینکه تراکم تعداد ذرات تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد، منجر به اندازه ذرات غیرواقعی می‌شود. اندازه ذره‌هایی که به‌طور قابل توجهی کوچک‌تر از اندازه ذرات اولیه یا حتی یک اتم کربن‌اند می‌تواند پیش‌بینی شود. به‌منظور اجتناب از این مشکل، فرض شده است که اگر نرخ اکسیداسیون بر نرخ‌های مربوط به آغاز پیدایش ذرات و رشد آن‌ها غلبه کند و اندازه ذره به‌اندازه‌ای بسیار کوچک‌تر از ذره اولیه کاهش پیدا کند، اکسیداسیون دوده بدون تغییر اندازه ذره ادامه می‌یابد و به‌جای آن تراکم تعداد ذره برای محاسبه از بین رفتن جرم دوده، شروع به کاهش می‌کند [۲۱]. در اینجا مقدار تعداد در واحد حجم ذرات تا حدود $1 \times 10^{+10}$ که همچنان تعداد قابل ملاحظه‌ای است، کاهش می‌یابد. در بررسی رفتار این مشخصه از دوده نیز رفتار و روند مشاهده‌شده مشابه رفتارهای ارائه‌شده از آن در مراجع مختلف است [۲۲]. شکل ۹، به‌منظور بزرگ‌نمایی تغییرات، در محدوده کوچک‌تری از زاویه لنگ نسبت به کل بازه تغییرات آن رسم شده است.

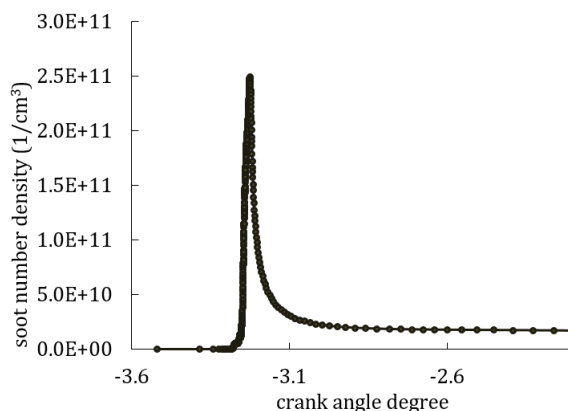


Figure 9- In-cylinder temporal evolution of soot number density
 شکل ۹- تغییرات تعداد در واحد حجم ذرات دوده با زاویه لنگ در محفظه احتراق

قطر ذرات دوده

یکی دیگر از مهم‌ترین پارامترهایی که در مدل‌سازی دوده مورد بررسی قرار می‌گیرد، قطر ذرات دوده است. در شکل ۱۰، تغییرات قطر ذرات دوده در بازه تشکیل و اکسیداسیون آن نشان داده شده است. این قطر نمایانگر قطر متوسط تمامی ذرات دوده موجود در سیلندر در هر زاویه موردنظر است که می‌تواند شامل ذراتی با ابعادی حتی کوچک‌تر از قطر اولیه ذرات (کوچک‌تر از ۱ نانومتر)، به‌علت اکسیداسیون آن‌ها، و یا حتی ذراتی با قطر چند میکرومتر در نتیجه نرخ بالاتر واکنش‌های رشد نسبت به اکسیداسیون باشد. قطر ذرات در طی مراحل برخورد و رشد سطحی به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد و در طی مرحله اکسیداسیون کاهش می‌یابد.

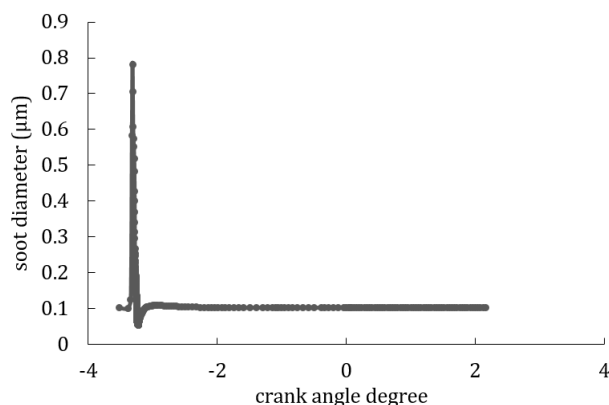


Figure 10- In-cylinder temporal evolution of average particle diameter
 شکل ۱۰- تغییرات قطر متوسط ذرات دوده با زاویه لنگ در محفظه احتراق

اگرچه، در بسیاری از نتایج شبیه‌سازی‌های در دسترس تغییرات قطر متوسط ذرات از صفر آغاز شده است [۲۲]، در نتایج ارائه‌شده در اینجا، به‌دلیل آنکه شرط تشکیل ذرات از پیش‌ماده دوده وجود تعداد کافی ذره در هر سلول محاسباتی در نظر گرفته شده است، اولین قطر ارائه‌شده برای ذرات دوده در شکل ۱۰ بیانگر قطر متوسط تعداد زیادی ذره (و نه یک ذره) در آغاز تشکیل دوده است و به همین دلیل، مقداری غیرصفر و قابل توجه (در حدود ۱۰۰ نانومتر) است. قطر پس از رسیدن به بیشینه مقدار آن به تدریج، با کم‌شدن نرخ واکنش‌ها به‌علت کم‌شدن دما، شروع به کاهش می‌کند و در کسری از بیشینه مقدار آن، که در اینجا در حدود ۰/۱ میکرومتر است، روند کاهشی با دامنه کمی را ادامه می‌دهد.

مکان توده دوده در داخل سیلندر

کانتورهای دوده، در ابتدا و انتهای بازه زاویه‌ای تشکیل و اکسیداسیون آن، برای نشان دادن روند و محل تشکیل دوده بر روی مقطع گذرنده از مرکز محفظه احتراق در شکل ۱۱ نشان داده شده‌اند. با تزریق سوخت و تبخیر آن در حدود ۴ میلی‌ثانیه بعد از پاشش سوخت، ذرات اولیه تشکیل‌دهنده دوده در فواره سوخت^۱ تشکیل می‌شوند و در بازه زمانی کوتاهی غلظت آن‌ها افزایش می‌یابد. با افزایش غلظت پیش‌ماده به‌عنوان گونه‌های اولیه سازنده ذرات دوده، توده‌ای از ذرات دوده به‌تدریج در محدوده مکانی پیش‌ماده، بسته به غلظت پیش‌ماده موجود، با غلظت‌های مختلف تشکیل می‌شود. با گذشت زمان، این توده‌های دوده نسبت به توده‌های اولیه بزرگ‌تر شده و یک توده دوده واحد با غلظت‌های مختلف در بخش‌های مختلف آن را تشکیل می‌دهند. علاوه بر امکان بررسی مشخصه‌های مختلف دوده با استفاده از این مدل‌سازی رفتار دوده، که در بخش‌های قبل بررسی و تحلیل شد، ایجاد قابلیت تعیین موقعیت مکانی دوده در داخل سیلندر با استفاده از این مدل در کد کیوا، امکان بررسی رفتار توده دوده، موقعیت‌های قرارگیری و تغییرات غلظت آن را در مدت زمان تشکیل و حضور دوده داخل محفظه احتراق فراهم می‌آورد.

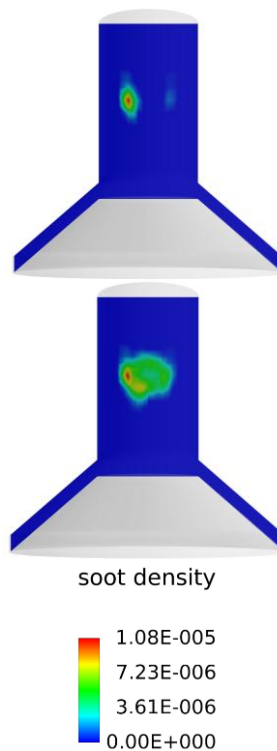


Figure 11- Soot formation site
شکل ۱۱- مکان توده دوده

نتیجه‌گیری

از آنجا که کد کیوا نسخه 3V برای مدل‌سازی فرایندهای تشکیل و اکسیداسیون دوده دارای نقص است و با توجه به اهمیت مدل‌سازی پدیده دوده برای انواع سوخت‌های دیزل و بیودیزل (به‌عنوان سوخت‌های جایگزین)، در این مقاله پدیده تشکیل و اکسیداسیون دوده با استفاده از یک مدل دوده چندمرحله‌ای، که قابلیت مدل‌سازی واقعی رفتار دوده را دارد، مدل شده است.

1. Fuel jet

در واقع مدل‌سازی دوده امکان درک رفتار واقعی دوده، روند شکل‌گیری و عوامل مؤثر در تشکیل آن را در روند ساده‌تری نسبت به آزمایش‌های تجربی، با توجه به شرایط خاص آزمون‌های تجربی این پدیده، فراهم می‌کند. در مدل‌سازی انجام‌شده، با در نظر گرفتن گونه‌های میانی حاصل از پیرولیز سوخت، برای آغاز تشکیل و رشد دوده، تأثیر گونه‌های رشد بر رشد و غلظت دوده مشخص شده است. استیلین و آروماتیک‌ها گونه‌های اصلی کنترل‌کننده تولید و رشد دوده‌اند و غلظت دوده در مراحل مختلف تشکیل آن با غلظت این گونه‌ها کنترل می‌شود. در واقع، مدل‌های دقیق دوده، که امکان تشکیل گونه‌های مختلف در ضمن پیرولیز سوخت را بررسی می‌کنند، نشان‌دهنده وابستگی مشخصات دوده به این گونه‌ها هستند.

گونه‌های استیلین و پیش‌ماده کلیه پارامترهای دوده نظیر غلظت، جرم، حجم، تعداد و قطر ذرات دوده را تحت تأثیر قرار می‌دهند، لذا کنترل روند تشکیل و غلظت آن‌ها از طریق شناخت عوامل تأثیرگذار بر تولید آن‌ها در نهایت می‌تواند کنترل‌کننده فرایندهای تشکیل دوده، میزان غلظت و حتی ابعاد نهایی ذرات دوده انتشار یافته باشد. در واقع این مدل با امکان پیش‌بینی تعداد ذرات و قطر آن‌ها، در کنار پیش‌بینی جرم ذرات دوده، امکان اجرای استراتژی‌های مختلف برای کاهش سطح انتشار ذرات بر مبنای قوانین وضع شده برای سطح انتشار آلاینده دوده را در مدل‌سازی‌های مختلف فراهم می‌آورد.

منابع

1. J. Xi and B. J. ZHong, "Review soot in diesel combustion systems," *Chem Eng Technol*, 6, 2006, pp. 65-73.
2. D. S. Kim, H. Omidvarborna and A. Kumar, "Recent studies on soot modeling for diesel combustion," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 48, 2015, pp. 635-647.
3. B. Oger, *Soot Characterization in Diesel Engine Using Laser-Induced Incandescence*, PhD Thesis, School of Engineering, University of Brighton, April 2012.
4. World Health Organization report, *Ambient air pollution: a global assessment of exposure and burden of disease*, Switzerland, 2016.
5. A. Fusco, A. L. Knox-Kelec and D. E. Foster, "Application of a phenomenological soot model to diesel engine combustion," *Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA)*, 3, pp. 571-576, Yokohama, Japan, 1994.
6. F. Tao, V. I. Golovtchev and J. Chomiak, "Application of complex chemistry to investigate the combustion zone structure of DI diesel sprays under engine-like conditions (DE-3) diesel engine combustion 3-modeling," *Proceedings of the Conference on Modeling And Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA)*, 5, pp. 92-100, Nagoya, Japan, 2001.
7. G. Vishwanathan and R. D. Reitz, "Application of a semi-detailed soot modeling approach for low temperature diesel combustion," *International multidimensional engine modeling user's group meeting at the SAE congress*, Detroit (MI), 2010.
8. S. Sukumaran, C. Van Huynh and S. C. Kong, "Modeling soot emissions in diesel spray using multistep soot model with detailed PAH chemistry," *International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress*, 23 April, 2012.
9. X. Cheng, L. Chen, F. Yan and S. Dong, "Study on soot formation characteristics in the diesel combustion process based on an improved detailed soot model," *Energy Conversion and Management*, 75, 2013, pp.1-10.
10. Z. Wang, L. Li, J. Wang and R. D. Reitz, "Effect of biodiesel saturation on soot formation in diesel engine," *Fuel*, 175, 2016, pp. 240-248.
11. W. Yang and et al., "Numerical study of soot particles from low temperature combustion of engine fueled with diesel fuel and unsaturation biodiesel fuels," *Applied Energy*, 211, 2018, pp. 187-193.
12. K. Poorghasemi, F. Ommi, V. Esfahanian, H. Tanabi, "Investigation on NO and Soot Reduction Mechanisms in a DI Diesel Engine by Split Injection Strategy," *Fuel and Combustion*, 3, No. 2, 2010, pp. 91-103. (in Persian)
13. M. Pishgooie, S. M. Hosseini Sarvari and S. H. Mansouri, "Radiation effect in a compression ignition internal combustion engine combustion chamber assuming gray media," *Modares Mechanical Engineering*, 17, No. 12, 2018, pp. 286-296. (in Persian)
14. T. Senčić, V. Medica and O. Bukovac, "Soot model validation and development," *Elsevier Advanced Engineering Journal*, 4, No. 1, 2010, pp. 75-86.
15. C. Crula, *Combustion processes in a Diesel Engine*, PhD Thesis, School of Engineering, University of Brighton, December 2002.
16. A. A. Amsden, KIVA-3V: A Block-structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves, Alamos National Laboratory Report LA-13313- MS, Los Alamos, NM, 1997.

17. V. F. Surovikin, "Analytical description of the processes of nucleus-formation and growth of particles of carbon black in the thermal decomposition of aromatic hydrocarbons in the gas phase," *Solid Fuel Chemistry*, 10, No. 1, pp. 92-101, 1976.
18. J. Nagle and R. F. Strickland-Constable, "Oxidation of carbon between 1000-2400 °C," *Carbon*, 1, 1964, pp. 333-334
19. F. Tao, R. D. Reitz, D. E. Foster, Y. Liu, "Nine-step phenomenological diesel soot model validated over a wide range of engine conditions," *International Journal of Thermal Sciences*, 48, 2009, pp.1223-1234.
20. K. M. Leung, R. P. Lindstedt and W. P. Jones, "A simplified reaction mechanism of soot formation in non-premixed flames," *Combustion and Flame*, 87, 1991, pp. 289-305.
21. A. Kazakov and D. E. Foster, "Modeling of soot formation during DI diesel combustion using a multi-step phenomenological model," *SAE Paper* 982463, 1998.
22. V. Rao and D. Honnery, "Application of a multi-step soot model in a thermodynamic diesel engine model," *Fuel*, 135, 2014, pp. 269-278.
23. F. Tao, D. E. Foster, R. D. Reitz, "Soot structure in a conventional non-premixed diesel flame," *SAE Paper* 2006-01-0196, 2006.

English Abstract

Numerical investigation of soot phenomenon in a CI engine

Ali Nassiri Toosi^{1*} and Atieh Safaei Arshi²

1- Department of Automotive Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, anasiri@iust.ac.ir

2- Department of Automotive Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, at_safaei@auto.iust.ac.ir

*Correspondent author

(Received: 2018.04.06, Received in revised form: 2018.08.06, Accepted: 2018.09.10)

Nowadays, a considerable part of the energy is the result of the combustion of hydrocarbon fuels in combustion systems. Therefore, efforts to improve and modify combustion processes and reduce the undesirable byproducts are of great concern. Among all the efforts made to improve the performance of combustion systems including reduction of pollutants, reduction of soot emissions has received special attention. This is due to the fact that soot emission is one of the major pollutants that have irreparable effects on human health, and affects the quality of life. Since the first step to reduce the soot pollution is to provide a comprehensive overview of its structure, mechanisms and also the effective parameters of its production, in this study, the phenomenon of soot formation and oxidation are investigated using one of the multi-step models presented for the formation and oxidation of soot to identify the behavior and parameters affecting soot formation. Numerical modeling of this phenomenon is carried out using KIVA-3V code. The results of the simulation are validated using the experimental data of pressure and the amount of soot formed in the combustion chamber of a two-stroke diesel engine with a direct injection system. Soot characteristics i.e., mass, volume and volume fraction of soot, species concentration, soot concentration, particle number density, average particle diameter, and the time and place of soot content in the combustion chamber are discussed as outputs of the model. The results show good agreement with the experimental data.

Keywords: combustion, pollutant, soot, numerical modeling